УДК 533.72

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ

В.В. ЛУКАШЕВ, В.Н. ПОПОВ

Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова
E-mail v.lukashev@narfu.ru; v.popov@narfu.ru

MODELING OF TRANSPORT PROCESSES IN KINETIC THEORY OF RAREFIED GASES

V.V. LUKASHEV, V.N. POPOV

Arctic federal university named after M.V. Lomonosov

Аннотация

В рамках кинетического подхода построены математические модели процессов тепло- и массопереноса в задаче о течении Пуазейля. Исходное неоднородное интегро-дифференциальное уравнение сведено к интегральному уравнению Фредгольма второго рода. Решение последнего найдено с использованием метода сеток.

Ключевые слова: Математические модели, кинетическое уравнение Больцмана, модельные кинетические уравнения, интегральное уравнение Фредгольма второго рода, метод сеток.

Summary

In the framework of the kinetic approach was used to construct mathematical models processes of heat and mass transfer in the problem of the Poiseuille flow. The original inhomogeneous integro-differential equation is reduced to an integral equation of the Fredholm second kind. The last solution found using the method of nets.

Key words: Mathematical models, kinetic Boltzmann equation, kinetic model equations, integral equation of the Fredholm second kind, the method of nets.

Введение

Теоретические исследования взаимодействия газа с обтекаемыми поверхностями являются исключительно сложными особенно для реальных поверхностей [1]. В силу этого по-прежнему актуальными остаются модели граничных условий, которые используют такие интегральные характеристики взаимодействия молекул газа с поверхностями, как коэффциенты аккомодации. Одной из таких моделей граничных условий является зеркально-диффузное граничное условие Максвелла [2]

$$f^{+}(\mathbf{r}'_s,\mathbf{v}) = (1-q)\, f^{-}(\mathbf{r}'_s,\mathbf{v}-2\mathbf{n_0}(\mathbf{n_0}\mathbf{v})) + q\, f_s(\mathbf{r}'_s,\mathbf{v}). \tag{1}$$

Здесь $f^{+}(\mathbf{r}'_s,\mathbf{v})$ — функция распределения молекул, падающих на стенку, $f^{-}(\mathbf{r}'_s,\mathbf{v})$ — отраженных от стенки зеркально, а $f_s(\mathbf{r}'_s,\mathbf{v})$ — отраженных от стенки диффузно, $\mathbf{r}'_s$ — координаты точек поверхности, $\mathbf{v}$ — скорости движения центров масс молекул газа, q — вероятность того, что молекула, летящая к стенке отразится диффузно, $1-q$ — вероятность того, что молекула, летящая к стенке отразится зеркально.

Аналитическое решение задачи о течении Пуазейля (течении газа в плоском канале с бесконечными параллельными стенками при наличии параллельного стенкам градиента давления) в случае полной аккомодации тангенциального инпульса молекул газа стенками канала получено в [3]. Целью представленной работы является получение решения задачи о течении Пуазейля с учетом коэффициента аккомодации тангенциального импульса молекул газа. При этом в качестве основного уравнения, описывающего кинетику процесса используется БГК (Бхатнагар, Гросс, Крук) модель кинетического уравнения Больцмана, а в качестве граничного условия на стенках канала — условие (1).

1. Постановка задачи

Рассмотрим течение разреженного газа в плоском канале, толщиной D', стенки которого расположены в плоскостях $x' = \pm d'$ прямоугольной декартовой системы координат ($d' = D'/2$). Предположим, что течение газа обусловлено наличием постоянного градиента давления. Направим ось Oz' вдоль градиента давления. Будем считать, что относительный перепад давления на длине свободного пробега молекул газа малым. Тогда рассматриваемая задача допускает линеаризацию и функцию распределения молекул газа по координатам и скоростям можно представить в виде

$$f(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = n(z)\beta^{3/2}\pi^{-3/2}\, \exp(-C^2)\, \left[1 + C_z G_n\, Z(x, C_x)\right]. \qquad (2)$$

Запишем в выбранной системе координат БГК модель кинетического уравнения Больцмана

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x'} + v_z \frac{\partial f}{\partial z'} = \frac{p}{\eta_g}(f_{eq} - f). \qquad (3)$$

Подставляя (2) в (3) и линеаризуя $f_{eq}(\mathbf{r}', \mathbf{v})$, приходим к уравнению для нахождения $Z(x, \mu)$ ($\mu = C_x$)

$$\mu \frac{\partial Z}{\partial x} + Z(x, \mu) + 1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp(-\tau^2)\, Z(x, \tau)\, d\tau. \qquad (4)$$

Общее решение (4) приведено в [4]

$$Z(x, \mu) = x^2 - 2x\mu + 2\mu^2 + A_0 + A_1(x - \mu) + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\frac{x}{\eta})\, F(\eta, \mu) a(\eta)\, d\eta, \qquad (5)$$

где A_0, A_1 и $a(\eta)$ — неизвестные параметры и функция, подлежащие дальнейшему определению,

$$F(\eta, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\, \eta\, \mathrm{P}\frac{1}{\eta - \mu} + \exp(\eta^2)\lambda(\eta)\, \delta(\eta - \mu), \qquad \lambda(z) = 1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\, z \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-\mu^2)}{\mu - z}\, d\mu,$$

$\mathrm{P}(1/z)$ — распределение в смысле главного значения при вычислении интеграла от $1/z$, $\delta(z)$ — дельта-функция Дирака.

С учетом используемой модели зеркально-диффузного отражения граничные условия на верхней и нижней стенках канала записываются в виде [4]

$$Z(d, \mu) = (1 - q) Z(d, -\mu), \quad \mu < 0, \qquad Z(-d, \mu) = (1 - q) Z(-d, -\mu), \quad \mu > 0. \qquad (6)$$

Подставляя (5) в граничные условия (6), после преобразований приходим к системе уравнений:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int\limits_{0}^{+\infty} \frac{\eta\, [B(-\eta, d) + B(\eta, -d)]\, d\eta}{\eta - \mu} + \exp(\mu^2)[B(-\mu, d) + B(\mu, -d)]\, \exp(d/\mu)\lambda(\mu) +$$
$$+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int\limits_{0}^{+\infty} \frac{\tau\, [B(-\tau, -d) + B(\tau, d)]\, d\tau}{\tau + \mu} = -2[d^2 + 2\mu^2 + A_0] q - 4d(2 - q)\mu, \qquad \mu > 0, \quad (7)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\frac{\eta[B(\eta,-d)-B(-\eta,d)]\,d\eta}{\eta-\mu}+\exp(\mu^2)[B(\mu,-d)-B(-\mu,d)]\,\exp(d/\mu)\lambda(\mu)-$$

$$-\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\frac{\tau\,[B(-\tau,-d)-B(\tau,d)]\,d\tau}{\tau+\mu}=2A_1[qd+\mu(2-q)],\qquad \mu>0,\quad (8)$$

$$B(\mu,d)=\exp(-d/\mu)a(\mu)-(1-q)\exp(d/\mu)a(-\mu).\qquad (9)$$

Уравнение (8) обращается в тождество при выполнении условий $A_1=0$ и $B(-\eta,-d)=B(\eta,d)$ (или, с учетом (9), $a(\mu)=a(-\mu)$). Тогда (7) представим в виде

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\frac{\eta\,B(\eta,-d)}{\eta-\mu}\,d\eta+\exp(\mu^2)B(\mu,-d)\lambda(\mu)=f(\mu),\qquad \mu>0,\qquad (10)$$

$$f(\mu)=-(d^2+2\mu^2+A_0)q+2d(2-q)\mu-\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\frac{\tau\,B(\tau,d)}{\tau+\mu}\,d\tau.\qquad (11)$$

Решение (10) ищем с использованием методов краевых задач теории функций комплексного переменного. С этой целью введем вспомогательную функцию, заданную интегралом типа Коши

$$N(z)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\frac{\eta\,B(\eta,-d)}{\eta-z}\,d\eta.\qquad (12)$$

Записывая краевые значения функций $N(z)$ и $\lambda(\mu)$ на верхнем и нижнем берегах разреза, после преобразований сведем интегральное уравнение (10) к краевой задаче Римана

$$N^+(\mu)\,X^+(\mu)-N^-(\mu)\,X^-(\mu)=\frac{X^-(\mu)}{\lambda^-(\mu)}\,2\sqrt{\pi}i\mu f(\mu)\,\exp(-\mu^2),\qquad \mu>0,\qquad (13)$$

$$X(z)=\frac{1}{z}\,\exp\left[\frac{1}{\pi}\int\limits_0^{+\infty}\frac{[\theta(\tau)-\pi]\,d\tau}{\tau-z}\right],\qquad \theta(\tau)=\frac{\pi}{2}-\operatorname{arctg}\frac{\lambda(\tau)}{\sqrt{\pi}\tau\exp(-\tau^2)}.$$

Решение построенной краевой задачи находим по формуле Сохоцкого-Племеля

$$N(z)=\frac{1}{X(z)}\,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)}\,\eta f(\eta)\,\exp(-\eta^2)\,\frac{d\eta}{\eta-z}.\qquad (14)$$

Рассматривая поведение (14) в окрестности бесконечно удаленной точки. приходим к условию разрешимости краевой задачи (13), из которого находим

$$A_0=-d^2+2Q_2-2dQ_1+q^{-1}\Big[4dQ_1+\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\tau\,X(-\tau)\,B(\tau,d)\,d\tau\Big].\qquad (15)$$

Здесь Q_n — интегралы Лойалки [4], в частности, $Q_1=-1.01619$, $Q_2=-1.26632$. Учитывая вид интегрального представления функции $X(z)$ и принимая во внимание (9), для нахождения $a(\mu)$ приходим к интегральному уравнению Фредгольма второго рода

$$a(\mu)=\frac{X(-\mu)\,\exp(-\mu^2-d/\mu)}{|\lambda^+(\mu)|^2\,[1-(1-q)\,\exp(-2d/\mu)]}\,\Big[q(Q_1-\mu+d)-2d-$$

$$-\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{+\infty}\frac{\tau\,[\exp(-d/\tau)-(1-q)\exp(d/\tau)]\,X(-\tau)a(\tau)\,d\tau}{\tau+\mu}\Big],\qquad \mu>0.\quad (16)$$

Решение (16) найдем с использованием сеточных методов. Так как правая часть (16) содержит множитель $\exp(-\mu^2)$, то входящий в нее интеграл быстро сходится. В силу этого в качестве верхнего предела интегрирования в (16) принималось значение, равное 5. Введем обозначения

$$h(\mu) = \frac{X(-\mu)\exp(-\mu^2 - d/\mu)}{|\lambda^+(\mu)|^2(1-(1-q)\exp(-2d/\mu))}, \qquad f(\mu) = (q(Q_1 - \mu + d) - 2d)h(\mu), \qquad \lambda = 1/\sqrt{\pi},$$

$$K(\tau,\mu) = h(\mu)\tau\left[\exp(-d/\tau) - (1-q)\exp(d/\tau)\right]X(-\tau)\frac{a(\tau)}{\tau+\mu}$$

и перепишем (13) в виде

$$a(\mu) = f(\mu) + \lambda\int\limits_0^{+\infty} K(\tau,\mu)\,a(\tau)\,d\tau. \tag{17}$$

Введем равномерную сетку на отрезке $[0,5]$ с шагом h, заменим интеграл, входящий в правую часть уравнения (17), его приближенным значением, вычисленным с помощью квадратурной формулы, и запишем полученное уравнение для каждого значения переменной μ в узлах введенной ранее сетки

$$a(\mu_j) = f(\mu_j) + \lambda\sum_{i=0}^{n} D_i K(\tau_i,\mu_j)a(\tau_i), \tag{18}$$

где n — число узлов сетки, μ_i и τ_j — значения свободной и подынтегральной переменной в узлах сетки, D_i - весовые коэффициенты квадратурной формулы. Введем обозначения: $K_{i,j} = K(\tau_i,\mu_j)$, $f_j = f(\mu_j)$, $a_j = a(\mu_j)$ и получим систему из n линейных алгебраических уравнений с n неизвестными

$$\begin{cases} a_1(1-\lambda D_1K_{1,1}) - a_2\lambda D_2K_{2,1} - \ldots - a_n\lambda D_nK_{n,1} = f_1, \\ -a_1\lambda D_2K_{1,2} + a_2(1-\lambda D_2K_{2,2}) - \ldots - a_n\lambda D_nK_{n,2} = f_2, \\ \ldots \\ -a_1\lambda D_1K_{1,n} - a_2\lambda D_2K_{2,n} - \ldots + a_n(1-\lambda D_nK_{n,n}) = f_n. \end{cases}$$

Для решения построенной системы уравнений, был использован матричный метод, в результате применения которого искомая функция $a(\mu)$ была найдена в виде n-мерного вектора ее значений в узловых точках. С использованием полученного n-мерного вектора находим значение параметра A_0

$$A_0 = -d^2 + 2Q_2 - 2dQ_1 + q^{-1}\Big[4dQ_1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} + \lambda\sum_{k=0}^{n} D_kJ_k\Big], \qquad J_k = \tau_kX(-\tau_k)B(d,\tau_k).$$

Таким образом, неизвестные параметры A_0, A_1 и функция $a(\mu)$, входящие в (5) найдены и функция распределения молекул газа по координатам и скоростям построена.

2. Нахождение макропараметров газа

С учетом построенной функции распределения вычислим скорость газа в канале $q_z'(x')$ и величину потока массы J_M' в направлении оси Oz', приходящуюся на единицу ширины канала. Исходя из статистического смысла функции распределения и учитывая (2), находим

$$u_z'(x') = \frac{1}{n}\int v_z f(\mathbf{r}',\mathbf{v})\,d^3\mathbf{v} = \left(\frac{2k_BT}{m}\right)^{1/2} U_z(x)\,\frac{1}{p}\,\frac{dp}{dz},$$

$$U_z(x) = \pi^{-3/2}\int \exp(-C^2)\,C_z^2 Z(x,C_x)\,d^3\mathbf{C} = \frac{1}{2}[x^2 + 1 + A_0] + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{\infty}\mathrm{ch}(x/\mu)\,a(\mu)\,d\mu, \tag{19}$$

где $U_z(x)$ - безразмерная массовая скорость газа. Величину потока массы J_M' в направлении оси Oz', приходящуюся на единицу ширины канала, вычислим согласно [5] и [6]

$$J_M = -\frac{2}{D^2}\int\limits_{-D/2}^{D/2} U(x)\,dx = \frac{D}{12} + \frac{1}{D}(1+A_0) + \frac{4}{D^2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{\infty}\mu a(\mu)\,\mathrm{sh}(\frac{d}{\mu})\,d\mu, \qquad D = 2d. \tag{20}$$

Аналогичным образом находим z-компоненту вектора потока тепла

$$q'_z(x') = \int \frac{m}{2}(v_z - u_z(\mathbf{r}))\,|\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}')|^2\, f(\mathbf{r}', \mathbf{v}) d^3v = \frac{n\,k_B T}{\beta^{1/2}} q_z(x) G_n,$$

$$q_z(x) = \pi^{-3/2} \int \exp(-C^2) C_z^2 (C^2 - 5/2) Z(x, C_x) d^3C = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int\limits_0^{+\infty} \mathrm{ch}(d/\eta) a(\eta)\, d\eta. \qquad (21)$$

Здесь $q_z(x)$ - безразмерная z-компонента вектора потока тепла.

Интегрируя выражение для $q_z(x)$ по переменной x от $-d$ до d, находим безразмерный поток тепла, приходящийся на единицу ширины канала

$$J_Q = -\frac{1}{2d^2} \int\limits_{-d}^{d} q_z(x)\, dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi} d^2} \int\limits_0^{\infty} \mu a(\mu)\, \mathrm{sh}(d/\mu)\, d\mu - \frac{1}{2d}. \qquad (22)$$

Значения J_M и J_Q согласно (20) и (22) вычислены в пакете прикладных программ Wolfram Mathematica 9. Результаты вычислений, а также аналогичные результаты, полученные в [5]–[7] с использованием метода дискретных ординат на основе БГК и S моделей кинетического уравнения Больцмана, линеаризованного уравнения Больцмана с оператором столкновений для молекул-жестких сфер (LBE) и модели уравнения Больцмана с комбинированным ядром (CES), приведены в таблицах 1 и 2.

D	$J_M(20)$	BGK [7]	S [5]	CES [6]	LBE [6]
$q = 0.1$					
0.1	20.62795			19.984	20.243
1.0	17.61955			17.522	17.564
10.0	18.7799			18.737	18.743
$q = 0.5$					
0.1	4.55644	4.556406	4.5801	4.3156	4.3868
1.0	3.36824	3.368218	3.3928	3.2959	3.3264
10.0	4.57281		4.5837	4.5285	4.5346
$q = 1.0$					
0.1	2.032724	2.032256	2.0395	1.9259	1.9499
1.0	1.53869	1.538678	1.5536	1.4863	1.5067
10.0	2.76868		2.7799	2.7220	2.7296

Таблица 1. Зависимость J_M от D при различных значениях q.

D	$J_Q(22)$	BGK [7]	S [5]	CES [6]	LBE [6]
$q = 0.1$					
0.1	−2.93136			−4.1416	−4.1701
1.0	−0.46498			−0.71489	−0.71258
10.0	−0.05173			−0.079621	−0.079140
$q = 0.5$					
0.1	−1.26646	−1.266442	−1.4012	−1.5426	−1.5680
1.0	−0.36855	−0.3685435	−0.49043	−0.5376	−0.52876
10.0	−0.058365		−0.087524	−0.086266	−0.084299
$q = 1.0$					
0.1	−0.694932	−0.6949272	−0.73268	−0.79087	−0.79928
1.0	−0.294906	−0.2948999	−0.36546	−0.40456	−0.38908
10.0	−0.066091		−0.098147	−0.093046	−0.089950

Таблица 2. Зависимость J_Q от D при различных значениях q.

Как следует из таблиц 1 и 2 отличие результатов, вычисленных на основе (20), от аналогичных, полученных с использованием метода дискретных ординат в [7] в рамках БГК модели кинетического уравнения Больцмана, не превышает 0.02% для всего диапазона приведенных значений D. Последнее подтверждает адекватность использованных в работе численных процедур, использованных при нахождении J_M. Отличие от результатов, полученных в рамках S, CES и LBE моделей, обусловлено существенной зависимостью результатов от выбора модели интеграла столкновений.

3. Заключение.

Итак, в работе построены математические модели тепло- и массопереноса в задаче о течении Пуазейля. Для случая диффузно-зеркального отражения молекул газа стенками канала вычислены потоки массы газа и тепла. Проведен численный анализ полученных выражений. Показано, что полученные в работе результаты с высокой степенью точности совпадают с аналогичными результатами, полученными ранее использованием численных методов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Черчиньяни К.** Математические методы в кинетической теории газов. — М: Мир, 1973. — 245 с.
2. **Коган М.Н.** Динамика разреженного газа. Кинетическая теория. — М: Наука, 1967. — 440 с.
3. **Попов В.Н., Тестова И.В., Юшканов А.А.** Аналитическое решение задачи о течении Пуазейля // Журнал СВМО. — 2010. — Т. 12, № 3. — С. 111–120.
4. **Латышев А.В., Юшканов А.А.** Аналитические решения граничных задач для кинетических уравнений. — М: МГОУ, 2004. — 286 с.
5. **Siewert C.E.** Poiseuille Thermal Creep and Couette Flow: Results Based on the CES Model Linearized Boltzmann Equation // European Journal of Mechanics B/Fluids. — 2002. — V. 21. — P. 579–597.
6. **Siewert C.E.** The linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems // Zeitschrift fur Angewandte Mathematic und Physik. — 2003. — V. 54. — P. 273–303.
7. **Barihcello L.B., Camargo M., Podrigues P., Siewert C.E.** Unified solutions to classical flow problems based on the BGK model // ZAMP. — 2001. — V. 52. — P. 517–534.

REFERENCES

1. **Cercignani C.** Mathematical methods in kinetic theory. — Macmillan, Italy. 1969. — 245 p.
2. **Kogan M.N.** Rarefied gas dynamics. Kinetic theory [Dinamika rasregennogo gasa. Kineticheskaya teoriya]. — Moscow: Nauka, 1967. — 440 p (in Russian).
3. **Popov V.N., Testova I.V., Yushkanov A.A.** Analytical solution of the problem of Poiseuille flow [Analiticheskoe reshenie zadachi o techenii Puaseilay]// Zurnal Sredne-Volgskogo matematicheskogo obshestva — Saransk: SGU. — 2010. — V. 12, № 3. — P. 111–120 (in Russian).
4. **Latushev A.V., Yushkanov A.A.** Analytical solutions of boundary-value problems for kinetic equations [Analiticheskie reheniay granichnyh zadach dlya kineticheskih uravnenii]. — Moscow: MGOU, 2004. — 286 p (in Russian).
5. **Siewert C.E.** Poiseuille Thermal Creep and Couette Flow: Results Based on the CES Model Linearized Boltzmann Equation // European Journal of Mechanics B/Fluids. — 2002. — V. 21. — P. 579-597.
6. **Siewert C.E.** The linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems // Zeitschrift fur Angewandte Mathematic und Physik. — 2003. — V. 54. — P. 273-303.
7. **Barihcello L.B., Camargo M., Podrigues P., Siewert C.E.** Unified solutions to classical flow problems based on the BGK model // ZAMP. — 2001. — V. 52. — P. 517-534.